

PROGRAMA CURSO DE POSGRADO**"Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear: Principios y Aplicaciones en Biociencias y Tecnologías"****Principios teóricos básicos de la espectroscopía de resonancia magnética nuclear.**

Magnetismo nuclear: Interacción de espines nucleares con campos electromagnéticos. Magnetización. Manipulación y detección de la magnetización.

Descripción cuántica de la RMN: El operador densidad. Poblaciones y coherencias. Formalismo de operadores producto.

La señal de RMN: Origen de la señal. Intensidad de la señal. Desplazamiento químico. Acoplamiento escalar. Acoplamiento dipolar. Interacciones cuadrupolares. Ejemplos.

Intercambio químico y conformacional: estudio de procesos dinámicos mediante RMN.

Relajación: Relajación longitudinal y transversal. Tiempos de relajación. Mecanismos de relajación y relación con las características moleculares. Relajación cruzada: efecto Overhauser nuclear. Relación con los mecanismos de relajación. Relación entre NOE y distancia interatómica.

Resonancia Magnética Nuclear monodimensional.

RMN de ^1H : Aspectos generales. Desplazamiento químico para el ^1H . Efecto de los sustituyentes, solvente, pH y enlaces hidrógeno. Efectos anisotrópicos. Equivalencia de núcleos. Sistemas de espines y simetría molecular. Acoplamiento ^1H - ^1H geminal, vecinal y a larga distancia. Acoplamiento con otros núcleos. Análisis de espectros.


RMN de ^{13}C y otros núcleos activos: Sensibilidad. Desplazamiento químico para ^{13}C , ^{31}P , ^{15}N . Acoplamientos con otros núcleos. Análisis de espectros. Transferencia de polarización. Secuencias INEPT y DEPT. Filtros cuánticos. Ciclos de fases. Pulsos de gradiente de campo.

Resonancia Magnética Nuclear en varias dimensiones.

Esquema general de un experimento multidimensional. Clasificación de los diferentes tipos de experimentos de RMN 2D y 3D. Espectroscopía de correlación homonuclear: secuencias COSY, NOESY, EXSY y ROESY. Espectroscopía de correlación heteronuclear: secuencias HMBC y HSQC. Estrategias para la selección de experimentos y abordaje del análisis de espectros.

Aspectos experimentales de la espectroscopía de RMN.

Descripción básica de un equipo de RMN. Preparación de la muestra. Adquisición y procesamiento de la señal. Digitalización y resolución espectral. Transformación de Fourier. Fase de las señales. Corrección de fase. Uso de software de procesamiento.



Dra. Rosa Erra Balsells
Directora
Depto. Química Orgánica

**Introducción a la determinación estructural de moléculas orgánicas y biomoléculas.
Aplicaciones de la RMN para Biociencias y Tecnologías.**

Análisis de estructuras de carbohidratos, lípidos y metabolitos secundarios. Estructura y dinámica de péptidos y proteínas. Interacciones proteína-ligando. Estructura y dinámica de ácidos nucleicos. Interacciones entre ácidos nucleicos y proteínas.

RMN en metabolómica. Identificación y cuantificación de compuestos en matrices complejas (alimentos, extractos biológicos, muestras ambientales).


Determinación estructural de polímeros sintéticos.

BIBLIOGRAFÍA

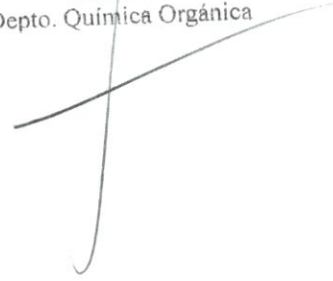
- NMR Spectroscopy Explained: Simplified Theory, Applications and Examples for Organic Chemistry and Structural Biology. N. E. Jacobsen. 2007, Wiley.
- Understanding NMR Spectroscopy. J. Keeler. 2002. Wiley.
- Basic ¹H- and ¹³C-NMR Spectroscopy. M. Balci. 2005. Elsevier Inc.
- NMR- From Spectra to structures. An Experimental Approach. 2nd edition. T.N. Mitchell, B. Costisella. 2007. Springer.
- Organic Structure Determination using 2-D NMR Spectroscopy. J.H. Simpson. 2008, Elsevier Inc.
- NMR in Biological Systems: From Molecules to Humans. K.V.R. Chary, G. Govil. 2008. Springer.
- Pocket Guide to Biomolecular NMR. M.Doucleff, M.Hatcher-Skeers, N.J. Crane. 2011. Springer.



J. Zamora



Dra. Rosa Erra Balsells
Directora
Depto. Química Orgánica





Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 505.064

Buenos Aires, - 3 AGO 2015

VISTO

la nota presentada por la Dra. Rosa Erra Balsells, Directora del Departamento de Química Orgánica, mediante la cual eleva información del curso de posgrado **Espectroscopía de resonancia magnética nuclear: principios y aplicaciones en biociencias y tecnologías** a dictarse durante el segundo cuatrimestre de 2015 por el Dr. Javier Alberto Ramírez con la colaboración de la Dra. Andrea Claudia Bruttomesso,

CONSIDERANDO:

lo actuado por la Comisión de Doctorado,

lo actuado por la Comisión de Posgrado,

lo actuado por este cuerpo en Sesión Ordinaria realizada en el día de la fecha,

en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo N° 113° del Estatuto Universitario,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE
CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
RESUELVE:

Artículo 1°: Autorizar el dictado del curso de posgrado **Espectroscopía de resonancia magnética nuclear: principios y aplicaciones en biociencias y tecnologías** de 60 hs. de duración.


Artículo 2°: Aprobar el programa del curso de posgrado **Espectroscopía de resonancia magnética nuclear: principios y aplicaciones en biociencias y tecnologías** obrante a fs 5 y 6 del expediente de la referencia.

Artículo 3°: Aprobar un puntaje máximo de tres (3) puntos para la Carrera del Doctorado.

Artículo 4°: Comuníquese a la Dirección del Departamento de Química Orgánica y a la Biblioteca de la FCEN (con fotocopia del programa fs 5 y 6). Comuníquese a la Secretaría de Posgrado y a la Dirección de Alumnos (sin fotocopia del programa). Cumplido Archívese

Resolución CD N°
SP / ga / 28/07/2015

1861


Dr. JOSE OLABE PARRAGUIRRE
SECRETARIO DE POSGRADO
FCEN - UBA


Dr. LUIS M. BARALDO VICTORICA
VICEDECANO